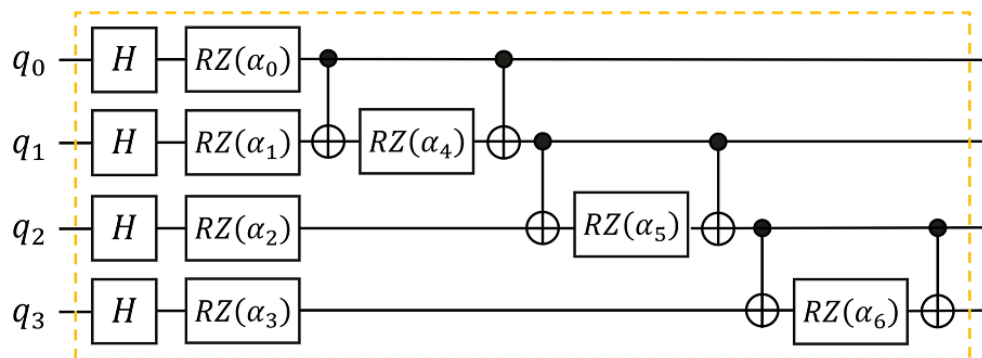



MindQuantum量子软件编程速成班——作业

第一天作业

1. 请搭建出如下线路。
2. 请打印线路运行后的量子态。
3. 请在线路末尾添加测量，并采样线路运行结果10000次，观察得到的分布。



其中， 是CNOT门，可以用 `X.on(q1, q0)` 实现。 $\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_6$ 可以是任意值。

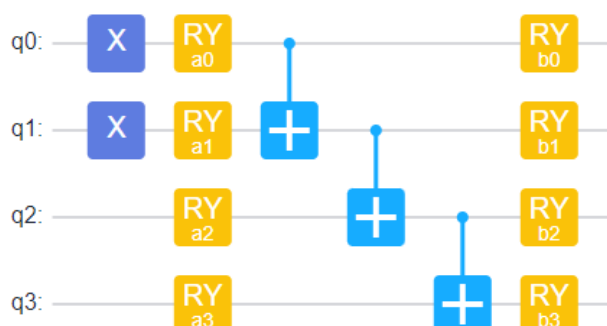
预期结果：对于随意的 $\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_6$ ，运行线路后的量子态应该难以发现规律，但添加测量后采样10000次的统计结果却是近似均匀分布。

解释：该线路是IQP编码线路，可以将经典信息编码到量子态上。当选取RZ门时，RZ门只会改变相位信息，而不会改变振幅信息，即 $\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_6$ 的信息将被编码至相位上。量子态中包含了振幅和相位的完整信息，因此难以发现规律；而采样得到的分布只与量子态的振幅有关，因此呈现均匀分布。

第二天作业

以下代码将得到氢分子的哈密顿量。请搭建出下图的Ansatz线路，优化其中的参数，使得该哈密顿量的期望值最小化。（[如果无法安装两个额外的包，请见题目末尾](#)）

```
from openfermion.chem import MolecularData
from openfermionpyscf import run_pyscf
from mindquantum import Hamiltonian, get_qubit_hamiltonian
mol = MolecularData([("H", (0, 0, 0)), ("H", (0, 0, 1))], "sto3g", multiplicity=1)
mol = run_pyscf(mol, run_fci=1)
ham = Hamiltonian(get_qubit_hamiltonian(mol))
```



预期结果：最优的哈密顿量期望值：-1.1011503

解释：这是一个量子化学问题，目标是求解两个氢原子间距为1Å时对应的基态能量。最优哈密顿量期望值应与经典量子化学算法FCI得到的基态能量 -1.1011503 基本相同。如果你得到了该结果，恭喜你成功实现了VQE算法demo!

验证结果：输入如下代码将打印分子的FCI能量：

```
print(mol.fci_energy)
```

注：如果无法安装两个额外的包，以下是基于纯mindquantum实现的氢分子哈密顿量：

```
from mindquantum import Hamiltonian, QubitOperator
terms0 = (
    QubitOperator("", -0.3276) + QubitOperator("Z0", 0.1372)
    + QubitOperator("Z1", 0.1372) + QubitOperator("Z2", -0.1304)
    + QubitOperator("Z3", -0.1304)
)
terms1 = (
    QubitOperator("Z0 Z1", 0.1566) + QubitOperator("Z0 Z2", 0.1062)
    + QubitOperator("Z0 Z3", 0.1554) + QubitOperator("Z1 Z2", 0.1554)
    + QubitOperator("Z1 Z3", 0.1062) + QubitOperator("Z2 Z3", 0.1633)
)
terms2 = (
    QubitOperator("X0 Y1 Y2 X3", 0.0492) + QubitOperator("Y0 Y1 X2 X3", -0.0492)
    + QubitOperator("X0 X1 Y2 Y3", -0.0492) + QubitOperator("Y0 X1 X2 Y3", 0.0492)
)
ham = Hamiltonian(terms0 + terms1 + terms2)
```

由于该哈密顿量的精度仅到小数点后4位，优化结果与理论值会稍有偏差，约为 -1.101136 附近，且有一定概率优化到局部最优。